

Operator Approach to the Master Equation for the One-Step Process

M. Hnatic,^{1,*} E. G. Eferina,^{2,†} A. V. Korolkova,^{2,‡} D. S. Kulyabov,^{2,3,§} and L. A. Sevastyanov^{2,1,¶}

¹*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*
²*Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*
³*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

Background: Presentation of the probability as an intrinsic property of the nature leads researchers to switch from deterministic to stochastic description of the phenomena. On the basis of the ideology of N. G. van Kampen and C. W. Gardiner, the procedure of stochastization of one-step process was formulated. It allows to write down the master equation based on the type of the kinetic equations (equations of interactions) and assumptions about the nature of the process (which may not necessarily be a birth–death process). The kinetics of the interaction has recently attracted attention because it often occurs in the physical, chemical, technical, biological, environmental, economic, and sociological systems. However, there are no general methods for the direct study of this equation. The expansion of the equation in a formal Taylor series (the so called Kramers–Moyal’s expansion) is used in the procedure of stochastization of one-step processes. It is also possible to apply system size expansion (van Kampen’s expansion). Leaving in the expansion terms up to the second order we can get the Fokker–Planck equation, and thus the Langevin equation. It should be clearly understood that these equations are approximate recording of the master equation.

Purpose: However, this does not eliminate the need for the study of the master equation. Moreover, the power series produced during the master equation decomposition may be divergent (for example, in spatial models). This makes it impossible to apply the classical perturbation theory.

Method: It is proposed to use quantum field perturbation theory for the statistical systems (the so-called Doi method). The perturbation series are treated in the spirit of the Feynman path integral, where the Green’s functions of the perturbed Liouville operator of the master equation are propagators. For more convenience of selection of the perturbed and unperturbed parts of the Liouville operator and to obtain the explicit form of the Green function of the master equation we need to rewrite the equation in the occupation number representation (Fock state).

Results: This work is a methodological material that describes the principles of master equation solution based on quantum field perturbation theory methods. The characteristic property of the work is that it is intelligible for non-specialists in quantum field theory. As an example the Verhulst model is used because of its simplicity and clarity (the first order equation is independent of the spatial variables, however, contains non-linearity).

Conclusions: We show the full equivalence of the operator and combinatorial methods of obtaining and study of the one-step process master equation.

Keywords: algebraic biology, stochastic differential equations; master equation; Fokker–Planck equation; population models

I. INTRODUCTION

In order to construct stochastic models of the one-step processes [1] (birth–death processes) the combinatorial methodology based on N. G. van Kampen [2] and C. W. Gardiner [3] ideology was worked out. Under this methodology the master equation (for one-step processes) is derived by using the interaction schemes. The obtained master equation is further converted to the

Fokker–Planck equation by expansion in formal series (Kramers–Moyal’s decomposition) [3]. However, it is necessary to study the possibility of using this expansion for each type of process.

Thus, it is necessary not only to study the master equation but also to justify its expansion. It seems that the quantum perturbation theory best fits all the requirements.

There are two types of formalism which are generally used in the quantum perturbation theory: the path integral formalism and the formalism of second quantization (canonical formalism). It is worthy of note that it is a matter of taste which type of formalism to use. In a number of works [4–9] the possibility of using the formalism of the second quantization for statistical tasks was studied. However, these articles are intended for theoret-

* hnatic@saske.sk
† eg.eferina@gmail.com
‡ akorolkova@sci.pfu.edu.ru
§ yamadharma@gmail.com
¶ leonid.sevast@gmail.com

ical physicist that strongly limits the audience that could use the scientific results of the articles.

The structure of the article is as follows. In the section II basic notations and conventions are introduced. Section III contains a brief introduction to the method of randomization of one-step processes. Section IV describes the algorithm of the one-step processes recording in terms of the occupation number representation. The master equation in the form of the Liouville operator equation is also presented. In the section V case study model for both the combinatorial and operator approaches is described. The equivalence of the combinatorial and the operator approaches is proved.

II. NOTATIONS AND CONVENTIONS

1. The abstract indices notation [10] is used in this work. Under this notation a tensor as a whole object is denoted just as an index (e.g., x^i), components are denoted by underlined index (e.g., $x^{\underline{i}}$).
2. We will adhere to the following agreements. Latin indices from the middle of the alphabet (i, j, k) will be applied to the space of the system state vectors. Latin indices from the beginning of the alphabet (a) will be related to the Wiener process space. Greek indices (α) will set a number of different interactions in kinetic equations.

III. ONE-STEP PROCESSES STOCHASTIZATION

The one-step processes (also known as the birth-death processes) are Markov processes with continuous time, integer state of states the transition matrix of which allows only transitions between neighbouring states.

A. Interaction schemes

The system state is defined by the vector $\varphi^i \in \mathbb{R}^n$, where n — is system order¹. The operator $I_j^i \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n$ describes the state of the system before the interaction, the operator $F_j^i \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n$ — after the interaction². The result of the interaction is the system transition from one state to another one.

There are s types of interaction in our system, so instead of I_j^i and F_j^i operators we will use operators $I_j^{i\alpha} \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_+^s$ and $F_j^{i\alpha} \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_+^s$ ³.

The interaction of the system elements will be described by interaction schemes which are similar to the schemes of the chemical kinetics:

$$I_j^{i\alpha} \varphi^j \xrightleftharpoons[{}^{-k_\alpha}]{{}^{+k_\alpha}} F_j^{i\alpha} \varphi^j, \quad (1)$$

the Greek indices specify the number of interactions and the Latin ones the system order. The coefficients ${}^{+k_\alpha}$ and ${}^{-k_\alpha}$ have the meaning of intensity (speed) of the interaction.

The state transition is given by the operator:

$$r_j^{i\alpha} = F_j^{i\alpha} - I_j^{i\alpha}. \quad (2)$$

Thus, the one step interaction $\underline{\alpha}$ in the forward and reverse directions can be written as

$$\begin{aligned} \varphi^i &\rightarrow \varphi^i + r_j^{i\alpha} \varphi^j, \\ \varphi^i &\rightarrow \varphi^i - r_j^{i\alpha} \varphi^j. \end{aligned}$$

We can also write (1) not as vector equations but as sums:

$$I_j^{i\alpha} \varphi^j \delta_i \xrightleftharpoons[{}^{-k_\alpha}]{{}^{+k_\alpha}} F_j^{i\alpha} \varphi^j \delta_i,$$

where $\delta_i = (1, \dots, 1)$.

Also the following notation will be used:

$$I^{i\alpha} := I_j^{i\alpha} \delta^j, \quad F^{i\alpha} := F_j^{i\alpha} \delta^j, \quad r^{i\alpha} := r_j^{i\alpha} \delta^j.$$

B. The master equation

For the system description we will use the master equation, which describes the transition probability for a Markov process [2, 3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi_2, t_2 | \varphi_1, t_1)}{\partial t} = \int & \left[w(\varphi_2 | \psi, t_2) p(\psi, t_2 | \varphi_1, t_1) - \right. \\ & \left. - w(\psi | \varphi_2, t_2) p(\varphi_2, t_2 | \varphi_1, t_1) \right] d\psi, \end{aligned}$$

where $w(\varphi | \psi, t)$ is the probability of transition from the state ψ to the state φ for unit time.

Fixing the initial values of φ_1, t_1 , we can write the equation for subensemble:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = \int [w(\varphi | \psi, t) p(\psi, t) - w(\psi | \varphi, t) p(\varphi, t)] d\psi. \quad (3)$$

If the domain of variation of φ is discrete, then the master equation (3) can be written as follows (the states are numbered by n and m):

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = \sum_m [w_{nm} p_m(t) - w_{mn} p_n(t)], \quad (4)$$

¹ For brevity, we denote the module over the field \mathbb{R} just as \mathbb{R} .

² The component dimension indices take values $i, j = \overline{1, n}$.

³ The component indices of number of interactions take on values $\alpha = \overline{1, s}$

where p_n is the probability to find the system in the state n at the time t , w_{nm} is the probability of the transition from the state m to the state n per unit time.

There are two types of system transitions from one state to another (based on one-step processes) as a result of system elements interaction: in the forward direction $(\varphi^i + r_j^{i\alpha} \varphi^j)$ with probability $^+s_{\alpha}(\varphi^k)$ and in the opposite direction $(\varphi^i - r_j^{i\alpha} \varphi^j)$ with probability $^-s_{\alpha}(\varphi^k)$ (fig. 1). The matrix of the transition probabilities has the form:

$$w_{\alpha}(\varphi^i|\psi^i, t) = ^+s_{\alpha} \delta_{\varphi^i, \psi^i+1} + ^-s_{\alpha} \delta_{\varphi^i, \psi^i-1},$$

where $\delta_{i,j}$ is Kronecker delta.

Thus, the general form of the master equation for the state vector φ^i , changing by steps of length $r_j^{i\alpha} \varphi^j$, is:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi^i, t)}{\partial t} = & \sum_{\alpha=1}^s \left\{ \left[^-s_{\alpha}(\varphi^i + r^{i\alpha}, t) p(\varphi^i + r^{i\alpha}, t) - \right. \right. \\ & \left. \left. - ^+s_{\alpha}(\varphi^i) p(\varphi^i, t) \right] + \right. \\ & \left. + \left[^+s_{\alpha}(\varphi^i - r^{i\alpha}, t) p(\varphi^i - r^{i\alpha}, t) - ^-s_{\alpha}(\varphi^i) p(\varphi^i, t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

The transition rates $^+s_{\alpha}$ and $^-s_{\alpha}$ are proportional to the number of ways of choosing the number of arrangements of φ^i to $I_{\varphi^i}^{i\alpha}$ (denoted as $A_{\varphi^i}^{I_{\varphi^i}^{i\alpha}}$) and to $F_{\varphi^i}^{i\alpha}$ (denoted as $A_{\varphi^i}^{F_{\varphi^i}^{i\alpha}}$) and defined by:

$$\begin{aligned} ^+s_{\alpha} &= ^+k_{\alpha} \prod_{i=1}^n A_{\varphi^i}^{I_{\varphi^i}^{i\alpha}} = ^+k_{\alpha} \prod_{i=1}^n \frac{\varphi^i!}{(\varphi^i - I_{\varphi^i}^{i\alpha})!}, \\ ^-s_{\alpha} &= ^-k_{\alpha} \prod_{i=1}^n A_{\varphi^i}^{F_{\varphi^i}^{i\alpha}} = ^-k_{\alpha} \prod_{i=1}^n \frac{\varphi^i!}{(\varphi^i - F_{\varphi^i}^{i\alpha})!}. \end{aligned} \quad (6)$$

Replacing in (6) the $\varphi(\varphi - 1) \cdots (\varphi - (n - 1))$ -type combinations on $(\varphi)^n$ we obtain for Fokker–Planck equation⁴:

$$\begin{aligned} ^+_{\text{fp}}s_{\alpha} &= ^+k_{\alpha} \prod_{i=1}^n (\varphi^i)^{I_{\varphi^i}^{i\alpha}}, \\ ^-_{\text{fp}}s_{\alpha} &= ^-k_{\alpha} \prod_{i=1}^n (\varphi^i)^{F_{\varphi^i}^{i\alpha}}. \end{aligned} \quad (7)$$

C. Fokker–Planck equation

Fokker - Planck equation is a special case of the master equation and can be regarded as its approximation.

We will use the decomposition of the Kramers–Moyal [3] (for simplicity it is written for the one-dimensional case):

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} [\xi^n(\varphi) p(\varphi, t)],$$

where

$$\xi^n(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \varphi)^n w(\psi|\varphi) d\psi.$$

By dropping the terms with order higher than the second one, we obtain the Fokker–Planck equation:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varphi} [A(\varphi) p(\varphi, t)] + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [B(\varphi) p(\varphi, t)], \quad (8)$$

and for multivariate case

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi^k, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \varphi^i} [A^i(\varphi^k) p(\varphi^k, t)] + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^i \partial \varphi^j} [B^{ij}(\varphi^k) p(\varphi^k, t)], \end{aligned} \quad (9)$$

where

$$\begin{aligned} A^i &:= A^i(\varphi^k) = r^{i\alpha} \left[^+_{\text{fp}}s_{\alpha} - ^-_{\text{fp}}s_{\alpha} \right], \\ B^{ij} &:= B^{ij}(\varphi^k) = r^{i\alpha} r^{j\alpha} \left[^+_{\text{fp}}s_{\alpha} - ^-_{\text{fp}}s_{\alpha} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

As can be seen from the (10), the coefficients of the Fokker–Planck equation can be obtained directly from the (2) and (6), that is, in this case, it is not necessary to write down the master equation.

D. Langevin equation

The Langevin equation which corresponds to Fokker–Planck equation:

$$d\varphi^i = a^i dt + b_a^i dW^a, \quad (11)$$

where $a^i := a^i(\varphi^k)$, $b_a^i := b_a^i(\varphi^k)$, $\varphi^i \in \mathbb{R}^n$ — system state vector, $W^a \in \mathbb{R}^m$ — m -dimensional Wiener process⁵. Latin indices from the middle of the alphabet will be applied to the system state vectors (the dimensionality of space is n), and Latin indices from the beginning of the alphabet denote the variables related to the Wiener process vector (the dimensionality of space is $m \leq n$).

The connection between the equations (9) and (11) is expressed by the following relationships:

$$A^i = a^i, \quad B^{ij} = b_a^i b_a^j.$$

⁴ This change corresponds to a series expansion.

⁵ Wiener process is realized as $dW = \varepsilon \sqrt{dt}$, where $\varepsilon \sim N(0, 1)$ — the normal distribution with mean 0 and variation 1.

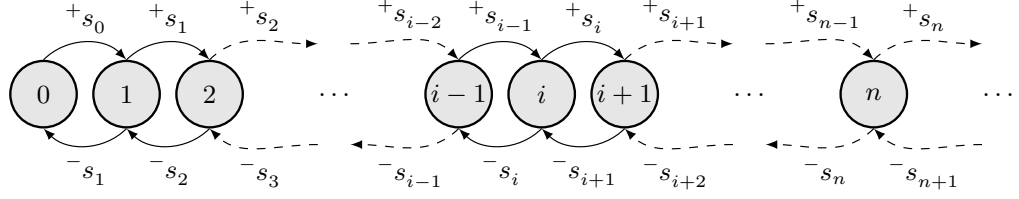


Figure 1. One-step process

IV. OCCUPATION NUMBERS REPRESENTATION

The occupation number representation is the main language in the description of many-body physics. The main elements of the language are the wave functions of the system, providing information about how many particles are in each single-particle state. The creation and annihilation operators are used for system states change. The advantages of this formalism are:

- it is possible to consider systems with a variable number of particles (non-stationary systems);
- the system statistics (Fermi–Dirac or Bose–Einstein) is automatically included in the commutation rules for the creation and annihilation operators;
- this is the second major formalism (along with the path integral) for the quantum perturbation theory description.

The application of the formalism of the second quantization to non-quantum systems (statistical, deterministic systems) was also studied [4, 5, 11–13].

The Dirac notation is commonly used for occupation numbers representation recording.

A. Dirac notation

This notation is proposed by P. A. M. Dirac [14]⁶. The vector φ^i is denoted $|i\rangle$, the covariant vector (covector) φ_i is denoted $\langle i|$. The conjunction operation is used for raising and lowering the indices⁷:

$$\varphi_i^* := \varphi_i = (\varphi^i)^\dagger \equiv \langle i| = |i\rangle^\dagger.$$

The scalar product is:

$$\varphi_i \varphi^i \equiv \langle i|i\rangle.$$

The tensor product is:

$$\varphi_j \varphi^i \equiv |i\rangle \langle j|.$$

Another form of the Dirac notation is also possible:

$$|\varphi\rangle := \varphi^i, \quad \langle i|\varphi\rangle := \varphi^i \delta_i^i = \varphi^i.$$

B. Creation and annihilation operators

The transition to the space of occupation numbers is not a unitary transformation. However, the algorithm of the transition (specific to each task) can be constructed.

This procedure is illustrated here for the master equation (4) for a system which does not depend on the spatial variables and is one-dimensional.

The probability that the system of interest consists of n particles is

$$\varphi_n := p_n(\varphi, t). \quad (12)$$

The vector space \mathcal{H} consists of states of φ .

The scalar product can be written:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n n! p_n^*(\varphi) p^n(\psi) = \sum_n n! \varphi_n^*(\varphi) \varphi^n(\psi) \quad (13)$$

and $|n\rangle$ is a basis vectors.

From $p_n(m) = \delta_n^m$ and (13) we obtain:

$$\langle n|m\rangle = n! \delta_n^m. \quad (14)$$

The state vector:

$$|\varphi\rangle = \sum_n p_n(\varphi) |n\rangle = \sum_n \varphi_n |n\rangle =: \varphi_n |n\rangle. \quad (15)$$

In view of (14), we get:

$$\varphi_n = \frac{1}{n!} \langle n|\varphi\rangle. \quad (16)$$

Creation and annihilation operators are defined respectively as:

$$\begin{aligned} \pi |n\rangle &= |n+1\rangle, \\ a |n\rangle &= n |n-1\rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

⁶ The notation is based on the notation, proposed by G. Grassmann in 1862 [15, p. 134].

⁷ In this case, we use Hermitian conjugation \bullet^\dagger . The sign of the complex conjugate \bullet^* in this entry is superfluous.

They satisfy the commutation rule⁸:

$$[a, \pi] = 1. \quad (18)$$

From (13) and (18) it follows that the system is described by Bose–Einstein statistics.

From (14) we get:

$$\langle m|a^\dagger|n\rangle = \langle m|\pi|n\rangle,$$

and therefore:

$$a^\dagger = \pi.$$

C. Liouville operator

The Liouville equation:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = L |\varphi(t)\rangle. \quad (19)$$

Liouville operator L satisfies the relation:

$$\langle 0|L = 0.$$

From (4), (15), (16) and (19) we obtain:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_n}{\partial t} &= \frac{1}{n!} \langle n| \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = \frac{1}{n!} \langle n| L |\varphi\rangle = \\ &= \sum_m [w_{nm} p_m - w_{mn} p_n]. \end{aligned} \quad (20)$$

In this way, the system of master equations (4) has been reduced to a single equation, the Liouville equation (19). The following Liouville operator corresponds to the scheme (1):

$$\begin{aligned} L = \sum_{\underline{\alpha}, \underline{i}} & \left[+k_{\underline{\alpha}} \left((\pi_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} - (\pi_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} \right) (a_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} + \right. \\ & \left. + -k_{\underline{\alpha}} \left((\pi_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} - (\pi_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} \right) (a_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

V. VERHULST MODEL

As a demonstration of the method, we consider the Verhulst model [16–18], which describes the limited growth⁹. Initially, this model was written down as the differential equation:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2,$$

where λ denotes the breeding intensity factor, β — the extinction intensity factor, γ — the factor of population reduction rate (usually the rivalry of individuals is considered)¹⁰.

The interaction scheme for the stochastic version of the model is:

$$\begin{aligned} \varphi &\xrightarrow[\gamma]{\lambda} 2\varphi, & I^{i\alpha} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}, & r^{i\alpha} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix}. \\ \varphi &\xrightarrow{\beta} 0, & F^{i\alpha} &= \begin{pmatrix} 2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (22)$$

The first relation means that an individual who eats one unit of meal is immediately reproduced, and in the opposite direction is the rivalry between individuals. The second relation describes the death of an individual.

A. One-step processes stochastization method

The correspondence between the terms entering the Fokker–Planck equation (7) and the transition rates defined within the Verhulst model is as follows:

$$\begin{aligned} +s_1 &= \lambda\varphi, & +_{\text{fp}}s_1 &= \lambda\varphi, \\ -s_1 &= \gamma\varphi(\varphi - 1), & -_{\text{fp}}s_1 &= \gamma\varphi^2, \\ +s_2 &= \beta\varphi, & +_{\text{fp}}s_2 &= \beta\varphi. \end{aligned}$$

Then, based on (5), the form of the master equation is:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} &= -[\lambda\varphi + \beta\varphi + \gamma\varphi(\varphi - 1)]p(\varphi, t) + \\ &+ [\beta(\varphi + 1) + \gamma(\varphi + 1)\varphi]p(\varphi + 1, t) + \lambda(\varphi - 1)p(\varphi - 1, t). \end{aligned} \quad (23)$$

For particular values of φ (as in (4)):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_n(t)}{\partial t} &:= \frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} \Big|_{\varphi=n} = \\ &= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n - 1)]p_n(t) + \\ &+ [\beta(n + 1) + \gamma(n + 1)n]p_{n+1}(t) + \lambda(n - 1)p_{n-1}(t). \end{aligned}$$

Through the use of (8) the Fokker–Planck equation is obtained:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varphi} (Ap(\varphi, t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (Bp(\varphi, t)),$$

The coefficients A and B are equal (refer to (10)):

$$\begin{aligned} A &= \lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2, \\ B &= \lambda\varphi + \beta\varphi - \gamma\varphi^2. \end{aligned}$$

From the Fokker–Planck equation the Langevin form of equivalent system of differential equations is obtained:

$$d\varphi(t) = (\lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2) dt + \sqrt{(\lambda\varphi + \beta\varphi - \gamma\varphi^2)} dW(t).$$

⁸ In fact, $a\pi|n\rangle - \pi a|n\rangle = (n+1)|n\rangle - n|n\rangle = |n\rangle$.

⁹ The attractiveness of this model is that it is one-dimensional and non-linear.

¹⁰ The same notation as in the original model [16] is used.

B. Occupation number representation

From (22) and (21) the Liouville operator is:

$$\begin{aligned} L &= \lambda(\pi^2 - \pi)a + \gamma(\pi - \pi^2)a^2 + \beta(1 - \pi)a = \\ &= \lambda((a^\dagger)^2 - a^\dagger)a + \gamma(a^\dagger - (a^\dagger)^2)a^2 + \beta(1 - a^\dagger)a = \\ &= \lambda(a^\dagger - 1)a^\dagger a + \beta(1 - a^\dagger)a + \gamma(1 - a^\dagger)a^\dagger a^2. \end{aligned}$$

The master equation by Liouville operator (from (20)) and by means of (14), (17), (12) and (16):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_n(t)}{\partial t} &= \frac{1}{n!} \langle n | L | \varphi \rangle = \\ &= \frac{1}{n!} \langle n | - [\lambda a^\dagger a + \beta a^\dagger a + \gamma a^\dagger a^\dagger a a] + \\ &\quad + [\beta a + \gamma a^\dagger a a] + \lambda a^\dagger a^\dagger a | \varphi \rangle = \\ &= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n-1)] \langle n | \varphi \rangle + \\ &+ [\beta(n+1) + \gamma(n+1)n] \langle n+1 | \varphi \rangle + \lambda(n-1) \langle n-1 | \varphi \rangle = \\ &= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n-1)] p_n(t) + \\ &+ [\beta(n+1) + \gamma(n+1)n] p_{n+1}(t) + \lambda(n-1) p_{n-1}(t). \end{aligned} \quad (24)$$

The result (24) coincides with the formula (23), which was obtained by combinatorial method.

VI. CONCLUSIONS

This article introduced the operator method for one-step processes. At all stages of the operator method it is compared with the combinatorial method of stochastization of the one-step processes. The logic of both methods is demonstrated. The complete equivalence of both methods is presented by their comparison.

However, at this stage it is a difficult task to justify a preference for one of the methods. But it should be noted that the operator formalism allows to use the achievements made within the framework of the quantum field theory in a more familiar way.

ACKNOWLEDGMENTS

The work is partially supported by RFBR grants No's 14-01-00628 and 15-07-08795.

Published in: M. Hnatič, E. G. Eferina, A. V. Korolkova, D. S. Kulyabov, L. A. Sevastyanov, Operator Approach to the Master Equation for the One-Step Process, EPJ Web of Conferences 108 (2016) 02027. doi:10.1051/epjconf/201610802027.

Sources: <https://bitbucket.org/yamadharma/articles-2014-sdu-doi>

-
- [1] E. G. Eferina, A. V. Korolkova, M. N. Gevorkyan, D. S. Kulyabov, L. A. Sevastyanov, One-Step Stochastic Processes Simulation Software Package, Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics" (3) (2014) 46–59. [arXiv:1503.07342](#).
 - [2] N. G. van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, North-Holland Personal Library, Elsevier Science, 2011.
 - [3] C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods: for Physics, Chemistry and the Natural Sciences, Springer Series in Synergetics, 1985.
 - [4] M. Doi, Second quantization representation for classical many-particle system, Journal of Physics A: Mathematical and General 9 (9) (1976) 1465–1477. doi:10.1088/0305-4470/9/9/008.
 - [5] M. Doi, Stochastic theory of diffusion-controlled reaction, Journal of Physics A: Mathematical and General 9 (9) (1976) 1479–1495. doi:10.1088/0305-4470/9/9/009.
 - [6] M. Hnatič, J. Honkonen, Velocity-fluctuation-induced anomalous kinetics of the $A+A \rightarrow$ reaction, Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics 61 (4 Pt A) (2000) 3904–3911.
 - [7] M. Hnatič, J. Honkonen, T. Lučivjanský, Field theory approach in kinetic reaction: Role of random sources and sinks, Theoretical and Mathematical Physics 169 (1) (2011) 1489–1498. [arXiv:1109.6435](#), doi:10.1007/s11232-011-0125-8.
 - [8] M. Hnatič, J. Honkonen, T. Lučivjanský, Study of anomalous kinetics of the annihilation reaction $A + A \rightarrow \emptyset$, Theoretical and Mathematical Physics 169 (1) (2011) 1481–1488. doi:10.1007/s11232-011-0124-9.
 - [9] M. Hnatič, J. Honkonen, T. Lučivjanský, Field-theoretic technique for irreversible reaction processes, Physics of Particles and Nuclei 44 (2) (2013) 316–348. doi:10.1134/S1063779613020160.
 - [10] R. Penrose, W. Rindler, Spinors and Space-Time: Volume 1, Two-Spinor Calculus and Relativistic Fields, Vol. 1, Cambridge University Press, 1987.
 - [11] Y. B. Zel'dovich, A. A. Ovchinnikov, The mass action law and the kinetics of chemical reactions with allowance for thermodynamic fluctuations of the density, Sov. Phys. JETP 47 (5) (1978) 829.
 - [12] P. Grassberger, M. Scheunert, Fock-Space Methods for Identical Classical Objects, Fortschritte der Physik 28 (10) (1980) 547–578. doi:10.1002/prop.19800281004.
 - [13] L. Peliti, Path integral approach to birth-death processes on a lattice, Journal de Physique 46 (9) (1985) 1469–1483. doi:10.1051/jphys:019850046090146900.
 - [14] P. A. M. Dirac, A new notation for quantum mechanics, Mathematical Proceedings of the Cam-

- bridge Philosophical Society 35 (03) (1939) 416.
doi:10.1017/S0305004100021162.
- [15] F. Cajori, A History of Mathematical Notations, Vol. 2, 1929.
- [16] P. F. Verhulst, Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement, Vol. 10, 1838.
- [17] W. Feller, Die Grundlagen der Volterraschen Theorie des Kampfes ums Dasein in wahrscheinlichkeitstheoretischer Behandlung, Acta Biotheoretica 5 (1) (1939) 11–40.
doi:10.1007/BF01602932.
- [18] W. Feller, On the theory of stochastic processes, with particular reference to applications, Proceedings of the [First] Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability (1949) 403–432.

Операторный подход к основному кинетическому уравнению для одношаговых процессов

М. Гнатич,^{1,*} Е. Г. Еферица,^{2,†} А. В. Королькова,^{2,‡} Д. С. Кулябов,^{2,3,§} and Л. А. Севастьянов^{2,1,¶}

¹Лаборатория теоретической физики,
Объединённый институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

²Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198

³Лаборатория информационных технологий,
Объединённый институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

Предпосылки: Взгляд на вероятность как имманентное свойство природы приводит исследователей к необходимости переходить от детерминистического описания явлений к стохастическому. На основе идеологии Н. Г. ван Кампена и К. В. Гардинера была сформулирована методика стохастизации одношаговых процессов. Она позволяет по виду уравнений кинетики (уравнений взаимодействия) и предположению о характере процесса (это может быть не обязательно процесс рождения-гибели) записать основное кинетическое уравнение. Кинетика взаимодействия привлекает в последнее время пристальное внимание к себе, поскольку часто возникает в физических, химических, технических, биологических, экологических, экономических, социологических системах. Однако общие методы для прямого исследования полученного уравнения отсутствуют. В методике стохастизации одношаговых процессов используется разложение уравнения в формальный ряд Тейлора (так называемое разложение Крамерса–Мойала). Также возможно разложение по обратному объёму системы (разложение ван Кампена). Оставляя в разложении члены вплоть до второго порядка малости можно получить уравнение Фоккера–Планка, а соответственно и уравнение Ланжевена. При этом нужно ясно понимать, что эти уравнения являются приближённой записью основного кинетического уравнения.

Цель: Однако это не снимает необходимости в методике исследования самого основного кинетического уравнения. Тем более, что степенной ряд, получаемый при разложении основного кинетического уравнения может расходиться (например, при наличии зависимости модели от пространственных переменных), что делает невозможным применение классической теории возмущений.

Методы: Выглядит перспективным применение квантово-полевой теории возмущений для статистических систем с использованием частичных сумм (так называемый метод Дои). При этом члены ряда теории возмущений рассматриваются в духе фейнмановских интегралов по траекториям, где роль пропагаторов играют функции Грина возмущённой части оператора Лиувилля основного кинетического уравнения. Для большего удобства выделения невозмущённой и возмущённой частей оператора Лиувилля, а также получения явного вида функции Грина исходное уравнение переписывается в представлении чисел заполнения (состояния Фока).

Результаты: Данная работа представляет собой методический материал, описывающий принципы решения основного кинетического уравнения методом квантово-полевой теории возмущений. Особенность изложения состоит в том, что оно рассчитано на неспециалистов в квантовой теории поля. В качестве демонстрационного примера предлагается модель Ферхюльста по причине её простоты и наглядности (первого порядка, не зависит от пространственных переменных, однако содержит нелинейность).

Выводы: Показана полная эквивалентность комбинаторного и операторного методов получения и исследования основного кинетического уравнения для одношаговых процессов.

Keywords: символьные методы в биологии; стохастические дифференциальные уравнения; основное кинетическое уравнение; уравнение Фоккера–Планка; популяционные модели

I. ВВЕДЕНИЕ

Для построения стохастических моделей одношаговых процессов [1] (процессов рождения гибели) была

отработана комбинаторная методика на основе идеологии Н. Г. ван Кампена [2] и К. В. Гардинера [3]. В рамках данной методики из схем взаимодействия строится основное кинетическое уравнение (конкретно в нашей методике исследуются одношаговые процессы). Само основное кинетическое уравнение не исследуется, а, вместо этого, преобразуется к уравнению Фоккера–Планка путём разложения в формальный ряд (разложение Крамерса–Мойала) [3]. Однако, возникает необходимость обоснования возможности при-

* hnatic@saske.sk

† eg.eferina@gmail.com

‡ avkorolkova@gmail.com

§ yamadharna@gmail.com

¶ leonid.sevast@gmail.com

менения данного разложения для каждого типа процессов.

Таким образом возникает необходимость как исследования самого основного кинетического уравнения, так и обоснование его разложения. Представляется, что наилучшим образом этим требованиям отвечает квантовая теория возмущений.

Обычно, для квантовой теории возмущений используют два формализма: формализм интегралов по траекториям и формализм вторичного квантования (канонический формализм). По большому счёту, применение одного из них есть дело вкуса. В целом ряде работ [4–9] было исследовано возможность применения формализма вторичного квантования для статистических задач. Однако стиль изложения в этих статьях направлен на физиков-теоретиков, что сильно ограничивает аудиторию, способную воспользоваться данными наработками.

Авторы ставили себе задачу изложить методику применения операторного метода хоть и формально, но доступно для первоначального изучения неспециалисту в соответствующих областях теоретической физики.

Структура статьи следующая. В разделе II введены основные обозначения и соглашения. В разделе III даётся краткое введение в метод стохастизации одношаговых процессов. В разделе IV описывается алгоритм записи одношаговых процессов в представлении чисел заполнения. А также записывается основное кинетическое уравнение в форме операторного уравнения Лиувилля. В разделе VI описывается иллюстративная модель, на базе которой демонстрируются как комбинаторный, так и операторный подходы. Показывается их эквивалентность.

II. ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОГЛАШЕНИЯ

1. В работе используется нотация абстрактных индексов [10]. В данной нотации тензор как целостный объект обозначается просто индексом (например, x^i), компоненты обозначаются подчёркнутым индексом (например, $x^{\underline{i}}$).
2. Будем придерживаться следующих соглашений. Латинские индексы из середины алфавита (i, j, k) будут относиться к пространству векторов состояний системы. Латинские индексы из начала алфавита (a) будут относиться к пространству винеровского процесса. Греческие индексы (α) будут задавать количество разных взаимодействий в кинетических уравнениях.

III. СТОХАСТИЗАЦИЯ ОДНОШАГОВЫХ ПРОЦЕССОВ

Под одношаговыми процессами (также известные как процессы рождения–гибели) понимаются марков-

ские процессы с непрерывным временем, принимающие значения в области целых чисел, матрица переходов которых допускает только переходы между соседними состояниями.

A. Схемы взаимодействия

Состояние системы будем описывать вектором состояния $\varphi^i \in \mathbb{R}^n$, где n — размерность системы¹. Оператор $I_j^i \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n$ задаёт состояние системы до взаимодействия, оператор $F_j^i \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n$ — после². В результате взаимодействия происходит переход системы в другое состояние.

В системе может происходить s видов различных взаимодействий. Поэтому вместо операторов I_j^i и F_j^i будем рассматривать операторы $I_j^{i\alpha} \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_+^s$ и $F_j^{i\alpha} \in \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_0^n \times \mathbb{N}_+^s$ ³.

Взаимодействие элементов системы будем описывать с помощью схем взаимодействия, подобным схемам химической кинетики:

$$I_j^{i\alpha} \varphi^j \xrightleftharpoons[+k_\alpha]{-k_\alpha} F_j^{i\alpha} \varphi^j, \quad (1)$$

здесь греческие индексы задают количество взаимодействий, а латинские — размерность системы. Коэффициенты $+k_\alpha$ и $-k_\alpha$ имеют смысл интенсивности (скорости) взаимодействия.

Изменение состояния будет задаваться оператором

$$r_j^{i\alpha} = F_j^{i\alpha} - I_j^{i\alpha}. \quad (2)$$

Таким образом, один шаг взаимодействия $\underline{\alpha}$ в прямом и обратном направлениях можно записать соответственно как

$$\begin{aligned} \varphi^i &\rightarrow \varphi^i + r_j^{i\alpha} \varphi^j, \\ \varphi^i &\rightarrow \varphi^i - r_j^{i\alpha} \varphi^j. \end{aligned}$$

Мы также можем записывать (1) не в виде векторных уравнений, а в виде более традиционных сумм:

$$I_j^{i\alpha} \varphi^j \delta_i \xrightleftharpoons[+k_\alpha]{-k_\alpha} F_j^{i\alpha} \varphi^j \delta_i,$$

где $\delta_i = (1, \dots, 1)$.

Также мы будем использовать следующие обозначения:

$$I^{i\alpha} := I_j^{i\alpha} \delta^j, \quad F^{i\alpha} := F_j^{i\alpha} \delta^j, \quad r^{i\alpha} := r_j^{i\alpha} \delta^j.$$

¹ Для краткости мы обозначаем модуль над полем \mathbb{R} просто как \mathbb{R} .

² Соответственно, компонентные индексы размерности системы пробегает значения $\underline{i}, \underline{j} = \overline{1, n}$.

³ Соответственно, компонентные индексы количества взаимодействий пробегает значения $\underline{\alpha} = \overline{1, s}$.

В. Основное кинетическое уравнение

Для описания системы используется основное кинетическое уравнение (*master equation*), определяющее вероятность перехода для марковского процесса [2, 3]:

$$\frac{\partial p(\varphi_2, t_2 | \varphi_1, t_1)}{\partial t} = \int \left[w(\varphi_2 | \psi, t_2) p(\psi, t_2 | \varphi_1, t_1) - w(\psi | \varphi_2, t_2) p(\varphi_2, t_2 | \varphi_1, t_1) \right] d\psi,$$

где $w(\varphi | \psi, t)$ есть вероятность перехода из состояния ψ в состояние φ за единичное время.

Зафиксировав начальные значения φ_1, t_1 , можно записать данное уравнение для подансамбля:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = \int [w(\varphi | \psi, t) p(\psi, t) - w(\psi | \varphi, t) p(\varphi, t)] d\psi. \quad (3)$$

При дискретной области определения φ можно записать (3) (пронумеровав состояния числами n и m):

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = \sum_m [w_{nm} p_m(t) - w_{mn} p_n(t)], \quad (4)$$

где p_n — вероятность нахождения системы в состоянии n в момент времени t , w_{nm} — вероятность перехода системы из состояния m в состояние n в единицу времени.

В системе, описываемой одношаговыми процессами, возможны два вида перехода системы из одного состояния в другое, происходящие в результате взаимодействия элементов в прямом направлении ($\varphi^i + r_j^{i\alpha} \varphi^j$) с вероятностью ${}^+s_{\underline{\alpha}}(\varphi^k)$ и в обратном направлении ($\varphi^i - r_j^{i\alpha} \varphi^j$) с вероятностью ${}^-s_{\underline{\alpha}}(\varphi^k)$ (рис. 1). А матрица вероятностей переходов может быть записана в виде:

$$w_{\underline{\alpha}}(\varphi^i | \psi^i, t) = {}^+s_{\underline{\alpha}} \delta_{\varphi^i, \psi^i+1} + {}^-s_{\underline{\alpha}} \delta_{\varphi^i, \psi^i-1},$$

где $\delta_{i,j}$ — символ Кронекера.

Таким образом, общий вид основного кинетического уравнения для вектора состояний φ^i , изменяющегося шагами длины $r_j^{i\alpha} \varphi^j$, принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi^i, t)}{\partial t} = & \sum_{\underline{\alpha}=1}^s \left\{ \left[-s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i + r^{i\alpha}, t) p(\varphi^i + r^{i\alpha}, t) - \right. \right. \\ & \left. \left. - {}^+s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i) p(\varphi^i, t) \right] + \right. \\ & \left. + \left[{}^+s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i - r^{i\alpha}, t) p(\varphi^i - r^{i\alpha}, t) - {}^-s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i) p(\varphi^i, t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Интенсивности перехода в единицу времени ${}^+s_{\underline{\alpha}}$ и ${}^-s_{\underline{\alpha}}$ пропорциональны соответственно числу способов

выбора числа размещений из φ^i по $I^{i\alpha}$ (обозначается как $A_{\varphi^i}^{I^{i\alpha}}$) и по $F^{i\alpha}$ (обозначается как $A_{\varphi^i}^{F^{i\alpha}}$) и определяются выражениями:

$$\begin{aligned} {}^+s_{\underline{\alpha}} &= {}^+k_{\underline{\alpha}} \prod_{i=1}^n A_{\varphi^i}^{I^{i\alpha}} = {}^+k_{\underline{\alpha}} \prod_{i=1}^n \frac{\varphi^i!}{(\varphi^i - I^{i\alpha})!}, \\ {}^-s_{\underline{\alpha}} &= {}^-k_{\underline{\alpha}} \prod_{i=1}^n A_{\varphi^i}^{F^{i\alpha}} = {}^-k_{\underline{\alpha}} \prod_{i=1}^n \frac{\varphi^i!}{(\varphi^i - F^{i\alpha})!}. \end{aligned} \quad (6)$$

Заменяя в (6) комбинации типа $\varphi(\varphi-1)\dots(\varphi-(n-1))$ на $(\varphi)^n$ получим для уравнения Фоккера–Планка⁴:

$$\begin{aligned} {}^+s_{\underline{\alpha}} &= {}^+k_{\underline{\alpha}} \prod_{i=1}^n (\varphi^i)^{I^{i\alpha}}, \\ {}^-s_{\underline{\alpha}} &= {}^-k_{\underline{\alpha}} \prod_{i=1}^n (\varphi^i)^{F^{i\alpha}}. \end{aligned} \quad (7)$$

С. Уравнение Фоккера–Планка

Уравнение Фоккера–Планка является частным случаем основного кинетического уравнения и может рассматриваться как его приближённая форма.

Будем использовать разложение Крамерса–Мойала [3] (для простоты записано в одномерном случае):

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varphi^n} [\xi^n(\varphi) p(\varphi, t)],$$

где

$$\xi^n(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \varphi)^n w(\psi | \varphi) d\psi.$$

Отбрасывая члены выше второго порядка, получаем уравнение Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varphi} [A(\varphi) p(\varphi, t)] + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [B(\varphi) p(\varphi, t)], \quad (8)$$

или в многомерном случае:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi^k, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \varphi^i} [A^i(\varphi^k) p(\varphi^k, t)] + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^i \partial \varphi^j} [B^{ij}(\varphi^k) p(\varphi^k, t)], \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} A^i &:= A^i(\varphi^k) = r^{i\alpha} \left[{}^+s_{\underline{\alpha}} - {}^-s_{\underline{\alpha}} \right], \\ B^{ij} &:= B^{ij}(\varphi^k) = r^{i\alpha} r^{j\alpha} \left[{}^+s_{\underline{\alpha}} - {}^-s_{\underline{\alpha}} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

⁴ Такая замена соответствует разложению в ряд.

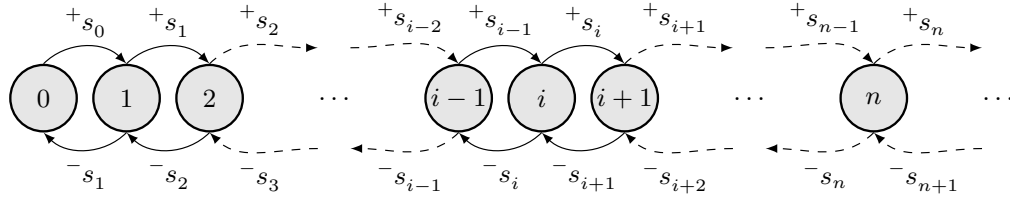


Рис. 1. Одношаговый процесс

Как видно из (10), коэффициенты уравнения Фоккера–Планка можно получить сразу из (2) и (6), то есть в данном случае записывать основное кинетическое уравнение нет необходимости.

Д. Уравнение Ланжевена

Уравнению Фоккера–Планка соответствует уравнение Ланжевена:

$$d\varphi^i = a^i dt + b_a^i dW^a, \quad (11)$$

где $a^i := a^i(\varphi^k)$, $b_a^i := b_a^i(\varphi^k)$, $\varphi^i \in \mathbb{R}^n$ — вектор состояния системы, $W^a \in \mathbb{R}^m$ — m -мерный винеровский процесс⁵. Здесь латинскими индексами из середины алфавита обозначаются величины, относящиеся к векторам состояний (размерность пространства n), а латинскими индексами из начала алфавита обозначаются величины, относящиеся к вектору винеровского процесса (размерность пространства $m \leq n$).

При этом связь между уравнениями (9) и (11) выражается следующими соотношениями:

$$A^i = a^i, \quad B^{ij} = b_a^i b^{ja}.$$

IV. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

Представление чисел заполнения является основным языком при описании физики многих тел. Главными элементами этого языка являются волновые функции системы, содержащие информацию о том, сколько частиц находится в каждом одночастичном состоянии. Для изменения состояния системы используют операторы рождения и уничтожения. Преимущества данного формализма следующие:

- возможно рассматривать системы с переменным числом частиц (нестационарные системы);

- статистика системы (Ферми–Дирака или Бозе–Эйнштейна) автоматически учитывается в правилах коммутации для операторов рождения–уничтожения;
- данный формализм является вторым основным формализмом (наряду с интегралами по траекториям) для описания квантовой теории возмущений.

Методика применения формализма вторичного квантования для некантовых систем (статистических, детерминированных) была рассмотрена в целом ряде статей [4, 5, 11–13].

Для записи представления чисел заполнения обычно используют нотацию Дирака.

А. Нотация Дирака

В нотации, предложенной П. А. М. Дираком [14]⁶, вектор φ^i задаётся в виде $|i\rangle$, а ковектор φ_i в виде $\langle i|$. Операция сопряжения служит для подымания и опускания индексов⁷:

$$\varphi_i^* := \varphi_i = (\varphi^i)^\dagger \equiv \langle i| = |i\rangle^\dagger.$$

Скалярное произведение имеет следующий вид:

$$\varphi_i \varphi^i \equiv \langle i|i\rangle.$$

Тензорное произведение имеет вид:

$$\varphi_j \varphi^i \equiv |i\rangle \langle j|.$$

Кроме того, возможна нотация и следующего вида:

$$|\varphi\rangle := \varphi^i, \quad \langle i|\varphi\rangle := \varphi^i \delta_i^i = \varphi^i.$$

⁵ Винеровский процесс реализуется как $dW = \varepsilon \sqrt{dt}$, где $\varepsilon \sim N(0, 1)$ — нормальное распределение со средним 0 и дисперсией 1.

⁶ Нотация Дирака базируется на нотации, предложенной Г. Грассманом в 1862 году [15, с. 134].

⁷ В данном случае мы используем эрмитово сопряжение \bullet^\dagger . Знак комплексного сопряжения \bullet^* в данной записи, по большому счёту, излишен.

В. Операторы рождения–уничтожения

Переход к пространству чисел заполнения не является унитарным преобразованием. Однако мы можем построить алгоритм перехода (впрочем, специфичный для каждой задачи).

Запишем основное кинетическое уравнение (4) в представлении чисел заполнения. Таким образом, мы будем рассматривать систему, не зависящую от пространственных переменных. Для простоты рассмотрим одномерный вариант.

Обозначим в (4) через φ_n вероятность обнаружить в системе n частиц:

$$\varphi_n := p_n(\varphi, t). \quad (12)$$

Состояния φ образуют векторное пространство \mathcal{H} . Введём скалярное произведение:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n n! p_n^*(\varphi) p^n(\psi) = \sum_n n! \varphi_n^*(\varphi) \varphi^n(\psi) \quad (13)$$

и базисные векторы $|n\rangle$.

Из $p_n(m) = \delta_n^m$ и (13) следует:

$$\langle n | m \rangle = n! \delta_n^m. \quad (14)$$

Запишем вектор состояния:

$$|\varphi\rangle = \sum_n p_n(\varphi) |n\rangle = \sum_n \varphi_n |n\rangle =: \varphi_n |n\rangle. \quad (15)$$

С учётом (14) имеем:

$$\varphi_n = \frac{1}{n!} \langle n | \varphi \rangle. \quad (16)$$

Введём операторы рождения и уничтожения:

$$\begin{aligned} \pi |n\rangle &= |n+1\rangle, \\ a |n\rangle &= n |n-1\rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Их коммутационное соотношение имеет вид⁸:

$$[a, \pi] = 1. \quad (18)$$

Из (18) видно, что при выборе скалярного произведения в виде (13) система описывается статистикой Бозе–Эйнштейна.

Из соотношения (14) получим:

$$\langle m | a^\dagger | n \rangle = \langle m | \pi | n \rangle,$$

таким образом, для скалярного произведения (13) имеем

$$a^\dagger = \pi.$$

С. Оператор Лиувилля

Запишем уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = L |\varphi(t)\rangle. \quad (19)$$

Оператор Лиувилля L удовлетворяет соотношению:

$$\langle 0 | L = 0.$$

Из (4), (15), (16) и (19) получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_n}{\partial t} &= \frac{1}{n!} \langle n | \dot{t} | \varphi \rangle = \frac{1}{n!} \langle n | L | \varphi \rangle = \\ &= \sum_m [w_{nm} p_m - w_{mn} p_n]. \end{aligned} \quad (20)$$

То есть уравнение Лиувилля (19) в форме одного уравнения записывает набор основных кинетических уравнений (4) для разных значений n .

Схеме (1) соответствует оператор Лиувилля:

$$\begin{aligned} L = \sum_{\alpha, i} \left[+k_{\alpha} \left((\pi_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} - (\pi_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} \right) (a_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} + \right. \\ \left. + k_{\alpha} \left((\pi_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} - (\pi_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} \right) (a_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

V. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

VI. МОДЕЛЬ ФЕРХЮЛЬСТА

В качестве демонстрации метода рассмотрим модель Ферхюльста [16–18], описывающую ограниченный рост⁹. Изначально эта модель описывается следующим дифференциальным уравнением:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2,$$

здесь λ — коэффициент интенсивности размножения, β — коэффициент интенсивности вымирания, γ — коэффициент интенсивности уменьшения популяции (обычно рассматривается соперничество особей)¹⁰.

Построим стохастический вариант данной модели. Запишем схемы взаимодействия:

$$\begin{aligned} \varphi \xrightarrow{\lambda} 2\varphi, \quad I_{\alpha}^{\alpha} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad r_{\alpha}^{\alpha} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix}, \\ \varphi \xrightarrow{\beta} 0, \quad F_{\alpha}^{\alpha} &= \begin{pmatrix} 2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (22)$$

Первое соотношение означает, что индивидуум, который съедает единицу пищи, немедленно репродуцируется, в обратную сторону — соперничество между индивидуумами. Второе — смерть индивидуума.

⁸ Действительно, $a\pi|n\rangle - \pi a|n\rangle = (n+1)|n\rangle - n|n\rangle = |n\rangle$.

⁹ Привлекательность этой модели в том, что она одномерна и нелинейна.

¹⁰ Здесь мы оставляем те же обозначения, что и в исходной модели [16].

А. Метод стохастизации одношаговых процессов

Согласно (7) определим интенсивности перехода:

$$\begin{aligned} {}^+s_1 &= \lambda\varphi, & {}^+_{\text{fp}}s_1 &= \lambda\varphi, \\ {}^-s_1 &= \gamma\varphi(\varphi - 1), & {}^-_{\text{fp}}s_1 &= \gamma\varphi^2, \\ {}^+s_2 &= \beta\varphi, & {}^+_{\text{fp}}s_2 &= \beta\varphi. \end{aligned}$$

Тогда (на основании (5)) основное кинетическое уравнение примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} &= -[\lambda\varphi + \beta\varphi + \gamma\varphi(\varphi - 1)]p(\varphi, t) + \\ &+ [\beta(\varphi + 1) + \gamma(\varphi + 1)\varphi]p(\varphi + 1, t) + \lambda(\varphi - 1)p(\varphi - 1, t). \end{aligned} \quad (23)$$

Или же, записывая для конкретных значений φ (как в (4)):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_n(t)}{\partial t} &:= \left. \frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} \right|_{\varphi=n} = \\ &= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n - 1)]p_n(t) + \\ &+ [\beta(n + 1) + \gamma(n + 1)n]p_{n+1}(t) + \lambda(n - 1)p_{n-1}(t). \end{aligned}$$

Пользуясь формулой (8), получим уравнение Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varphi} (Ap(\varphi, t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (Bp(\varphi, t)),$$

Коэффициенты A и B соответственно равны (см. (10)):

$$\begin{aligned} A &= \lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2, \\ B &= \lambda\varphi + \beta\varphi - \gamma\varphi^2. \end{aligned}$$

Из уравнения Фоккера–Планка получим эквивалентное ему СДУ в форме Ланжевена:

$$d\varphi(t) = (\lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2) dt + \sqrt{(\lambda\varphi + \beta\varphi - \gamma\varphi^2)} dW(t).$$

В. Представление чисел заполнения

На основании (22) и (21) получаем оператор Лиувилля:

$$L = \lambda(\pi^2 - \pi)a + \gamma(\pi - \pi^2)a^2 + \beta(1 - \pi)a =$$

$$\begin{aligned} &= \lambda((a^\dagger)^2 - a^\dagger)a + \gamma(a^\dagger - (a^\dagger)^2)a^2 + \beta(1 - a^\dagger)a = \\ &= \lambda(a^\dagger - 1)a^\dagger a + \beta(1 - a^\dagger)a + \gamma(1 - a^\dagger)a^\dagger a^2. \end{aligned}$$

Запишем основное кинетическое уравнение через оператор Лиувилля (из формулы (20)) и учтём (14), (17), (12) и (16):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_n(t)}{\partial t} &= \frac{1}{n!} \langle n | L | \varphi \rangle = \\ &= \frac{1}{n!} \langle n | - [\lambda a^\dagger a + \beta a^\dagger a + \gamma a^\dagger a^\dagger a a] + \\ &\quad + [\beta a + \gamma a^\dagger a a] + \lambda a^\dagger a^\dagger a | \varphi \rangle = \\ &= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n - 1)] \langle n | \varphi \rangle + \\ &+ [\beta(n + 1) + \gamma(n + 1)n] \langle n + 1 | \varphi \rangle + \lambda(n - 1) \langle n - 1 | \varphi \rangle = \\ &= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n - 1)]p_n(t) + \\ &+ [\beta(n + 1) + \gamma(n + 1)n]p_{n+1}(t) + \lambda(n - 1)p_{n-1}(t). \end{aligned} \quad (24)$$

Результат (24) полностью совпадает с формулой (23), полученной комбинаторным методом.

VII. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в статье введён операторный метод для одношаговых процессов. На всех этапах операторный метод сравнивается с комбинаторным методом стохастизации одношаговых процессов. Демонстрируется логика построения обоих методов. Сравнение показывает их полную эквивалентность.

Впрочем, на данном этапе обосновать предпочтение одного из методов представляется трудной задачей. Хотя нельзя не отметить, что операторный формализм позволяет более привычным образом использовать наработки, сделанные в рамках квантовой теории поля.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа частично поддержана грантами РФФИ № 14-01-00628 и 15-07-08795.

Опубликовано в: Hnatič M., Eferina E. G., Korolkova A. V. et al. Operator Approach to the Master Equation for the One-Step Process // EPJ Web of Conferences. — 2016. — Vol. 108. — P. 02027. — doi:10.1051/epjconf/201610802027.

Исходные тексты: <https://bitbucket.org/yamadharma/articles-2014-sdu-doi>

[1] Eferina E. G., Korolkova A. V., Gevorkyan M. N. et al. One-Step Stochastic Processes Simulation Software Package // Bulletin of Peoples' Friendship University of

Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics". — 2014. — no. 3. — P. 46–59. — 1503.07342.

[2] Ван-Кампен Н. Г. Стохастические процессы в физике

- и химии. — М. : Высшая школа, 1990.
- [3] Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках. — Мир, 1986.
- [4] Doi M. Second quantization representation for classical many-particle system // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1976. — Vol. 9, no. 9. — P. 1465–1477.
- [5] Doi M. Stochastic theory of diffusion-controlled reaction // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1976. — Vol. 9, no. 9. — P. 1479–1495.
- [6] Hnatich M., Honkonen J. Velocity-fluctuation-induced anomalous kinetics of the $A+A \rightarrow$ reaction // Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics. — 2000. — Vol. 61, no. 4 Pt A. — P. 3904–3911.
- [7] Гнатич М., Хонконен Ю., Лучивянски Т. Теоретико-полевой подход к описанию кинетических реакций. Роль случайных источников и стоков // Теоретическая и математическая физика. — 2011. — Т. 169, № 1. — С. 146–157.
- [8] Гнатич М., Хонконен Ю., Лучивянски Т. Исследование аномальной кинетики реакции аннигиляции $A + A \rightarrow \emptyset$ // Теоретическая и математическая физика. — 2011. — Т. 169, № 1. — С. 137–145.
- [9] Hnatič M., Honkonen J., Lučivjanský T. Field-theoretic technique for irreversible reaction processes // Physics of Particles and Nuclei. — 2013. — Vol. 44, no. 2. — P. 316–348.
- [10] Пенроуз Р., Риндлер В. Спиноры и пространство-время. Два-спинорное исчисление и релятивистские поля. — М. : Мир, 1987. — Т. 1.
- [11] Зельдович, Я. Б. Овчинников А. А. Закон действующих масс и кинетика химических реакций с учетом термодинамических флуктуаций плотности // ЖЭТФ. — 1978. — Т. 74, № 5. — С. 1588.
- [12] Grassberger P., Scheunert M. Fock-Space Methods for Identical Classical Objects // Fortschritte der Physik. — 1980. — Vol. 28, no. 10. — P. 547–578.
- [13] Peliti L. Path integral approach to birth-death processes on a lattice // Journal de Physique. — 1985. — Vol. 46, no. 9. — P. 1469–1483.
- [14] Dirac P. A. M. A new notation for quantum mechanics // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — 1939. — Vol. 35, no. 03. — P. 416.
- [15] Cajori F. A History of Mathematical Notations. — 1929. — Vol. 2. — P. 367.
- [16] Verhulst P. F. Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement. — 1838. — Vol. 10. — P. 113–117.
- [17] Feller W. Die Grundlagen der Volterraschen Theorie des Kampfes ums Dasein in wahrscheinlichkeitstheoretischer Behandlung // Acta Biotheoretica. — 1939. — Bd. 5, H. 1. — S. 11–40.
- [18] Feller W. On the theory of stochastic processes, with particular reference to applications // Proceedings of the [First] Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability. — 1949. — P. 403–432.